Доклады Академии наук СССР
1970. Том 194, № 1

ФИЗИКА

УДК 539.186.22

М. И. ЧИБИСОВ

ДИСПЕРСИОННАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ АТОМА ВОДОРОДА В ОСНОВНОМ СОСТОЯНИИ

(Представлено академиком М. А. Леонтовичем 23 II 1970)

1. Согласно квантовой теории, оптическая поляризуемость атома водорода в основном состоянии равна:

$$\alpha(\omega) = 2\sum_{n=2}^{\infty} \frac{\nu_n |z_{0n}|^2}{\nu_n^2 - \omega^2} + 2\int_0^{\infty} \frac{\nu |r_{0\nu}|^2}{\nu^2 - \omega^2} d\nu, \tag{1}$$

где ν_n — частоты переходов из основного состояния в n-е возбужденное состояние дискретного спектра; ν — то же для перехода в непрерывный спектр атома водорода; z_{0n} — матричный элемент z-компоненты дипольного момента. Используется атомная система единиц: $\hbar = m = e^2 = 1$. При помощи аппарата гриновских функций и преобразования Лапласа промежуточного дифференциального уравнения поляризуемость (1) можно представить в виде [1, 2]

$$\alpha(\omega) = -\frac{2}{3\omega}[f(\omega) - f(-\omega)]; \tag{2}$$

$$f(\omega) = \frac{96}{p_2^a p_1^{4-a}} \int_{p_1}^{2} \frac{(x-p_1)^{a-1}(x-p_2)^{3-a}}{x^5} dx; \tag{2'}$$

$$p_1 = 1 + \sqrt{1 + 2\omega}; \quad p_2 = 2 - p_1; \quad a = 2 - \frac{1}{p_1 - 1}; \quad -\infty < a \leqslant 2. \tag{2''}$$

Как видно из определения параметров $P_{1,2}$ и a, интеграл (2) не существует при $a \leqslant 0$ или $\omega \leqslant -\nu_1 = -{}^3/_8$. Для расширения области определения (2′) до области $-\nu_n < \omega < \infty$ требуется n-кратное интегрирование выражения (2′) по частям [1].

Анализ выражения (2) на плоскости комплексного x позволяет получить другое интегральное представление для $\alpha(\omega)$, свободное от указанного недостатка и в котором полюсная часть выделена в простое аналитическое слагаемое.

2. Точки p_1 и p_2 на плоскости комплексного x являются точками ветвления подынтегрального выражения в формуле (2). Разрез плоскости x можно провести по отрезку кривой, соединяющей эти точки. Для частот ω, при которых $a < -1$ и не равно целому числу, p_1 является существенно особою точкой. В начале координат $x = 0$ имеется полюс пятого порядка, вычет которого

$$\operatorname{Res} \frac{(x-p_1)^{a-1}(x-p_2)^{3-a}}{x^5}\bigg|_{x=0} \equiv Q(\omega) = \frac{-2}{3p_1^4}\left(\frac{3-a}{1-a}\right)^a. \tag{3}$$

Контур интегрирования в (2) должен быть таким, чтобы в пределе $\omega \to 0$ выражение (2) давало известное значение статической поляризуемости $\alpha(0) = 4{,}5$. Для этого достаточно, чтобы при $\omega \to 0$ ($p_1 \to 2$) контур, если и становился бы замкнутым, то не содержал внутри себя точки $x = 0$. В противном случае $f(\omega)$ было бы пропорционально вычету (3), который при $\omega \to 0$ расходится как ω^{-1}. Для $a \geqslant 0$ контуром интегрирозначения может быть отрезок действительной оси $(p_1, 2)$, что и дает $\alpha(0) = 4{,}5$ [1].

Ограничиваясь пока частотами, при которых $a \geqslant 0$, разобьем контур интегрирования в (2) на две части. Первая — нижний берег разреза от p_1 до p_2 и вторая — некоторая кривая, удовлетворяющая приведенным выше требованиям и соединяющая p_2 и 2. Интеграл по первому контуру обозначим J_3, а по второму J_2. Первый интеграл можно вычислить точно, выразив его через вычет $Q(\omega)$, а второй определен при любом ω. Так как на верхнем берегу разреза значения подынтегральной функции в (2) отличаются множителем $e^{2\pi i a}$ от значений функции на нижнем берегу, то

$$(1 - e^{2\pi i a})\, J_3 = \int\limits_C (x - p_1)^{a-1} (x - p_2)^{3-a} \frac{dx}{x^5}\,, \tag{4}$$

где контур C по часовой стрелке обходит разрез. Этот контур вместе с бесконечно большой окружностью (интеграл по которой стремится к нулю) ограничивают область, внутри которой находится точка $x = 0$, и поэтому интеграл (4) равен $2\pi i Q(\omega)$. Это дает

$$f(\omega) = \frac{96}{p_2^a p_1^{4-a}} \left[(\pi i - \pi \operatorname{ctg} \pi a)\, Q(\omega) + J_2(\omega)\right], \tag{5}$$

$$J_2(\omega) = \int\limits_{p_2}^{2} (x - p_1)^{a-1} (x - p_2)^{3-a} \frac{dx}{x^5}\,, \tag{6}$$

где вычет $Q(\omega)$ определен формулой (3).

Покажем, что для действительных ω формула (5) определяет действительную функцию $f(\omega)$. Для этого рассмотрим следующий контур интегрирования в (6): уход из p_2 параллельно мнимой оси на бесконечность и возвращение из бесконечности по действительной оси до точки $x = 2$. Вторая часть контура дает чисто действительный вклад. При интегрировании по первой ветви контура заметим, что подынтегральная функция в (6) удовлетворяет соотношению $\varphi(x^*) = \varphi^*(x)$, которое означает, что искомая мнимая часть интеграла (6) равна половине мнимой части того же интеграла, взятого по всей прямой $(p_2 - i\infty;\ p_2 + i\infty)$. Последний же интеграл равен $-2\pi i Q(\omega)$ (рассматриваем частоты $-\nu_1 < \omega < 0$, при которых $p_2 > 0$ и $a > 0$). Таким образом, вместо (5) для действительных ω можно написать

$$f(\omega) = \frac{96}{p_2^a p_1^{4-a}} \left[-\pi \operatorname{ctg}(\pi a) \cdot Q(\omega) + \operatorname{Re} J_2(\omega)\right]. \tag{7}$$

При целых a $\operatorname{ctg} \pi a$ обращается в ∞, и $f(\omega)$ имеет полюса. Действительно, $a = 2$ при $\omega = +\infty$, $a = 1$ при $\omega = 0$ и $a = -n$ при

$$\omega = -\tfrac{1}{2}(1 - 1/n^2) = -\nu_n. \tag{8}$$

Как видно из формулы (3), $Q(\omega)$ в этих точках не обращается в нуль. Следовательно, поляризуемость $\alpha(\omega)$ имеет полюса при $\omega = \nu_n$, как и должно быть. Других полюсов у $\alpha(\omega)$ нет.

Выражения (7) и (6) существуют при всех ω, что позволяет определить $f(\omega)$ на всей плоскости ω как аналитическое продолжение выражения (7), так как (7) имеет полюса лишь в отдельных точках.

Для положительных значений ω для $f(\omega)$ удобно сохранить представление (2′), а для $f(-\omega)$ использовать (7). Таким образом получаем поляризуемость атома водорода в основном состоянии:

$$\alpha(\omega) = \frac{64}{\omega} \left\{ \frac{1}{q_2^b q_1^{4-b}} \left[\pi Q(\omega) \operatorname{ctg} \pi a - \operatorname{Re} J_2(-\omega)\right] - \frac{J_1(\omega)}{p_2 p_1^{4-a}} \right\}, \tag{9}$$

$$J_1 = \int\limits_{p_1}^{z} (x - p_1)^{a-1} (x - p_2)^{3-a} \frac{dx}{x_5}, \tag{10}$$

$$J_2 = \int\limits_{p_2}^{2} (x - q_1)^{b-1} (x - q_2)^{3-b} \frac{dx}{x^5}, \quad b = a(-\omega), \quad q_{1,2} = p_{1,2}(-\omega). \tag{11}$$

Для исследования J_2 рассматриваем определенный выше контур, состоящий из двух отрезков: первый X от p_2 до $p_2 - i\infty$ и второй $2 < x < +\infty$. Для первого отрезка производим замену переменной $x = p_2 - iy$, а для второго $x = 2 + y$ и получаем

$$\mathrm{Re}\, J_2 = j_1 + j_2,$$

$$j_1 = -\,\mathrm{Re} \int\limits_0^\infty \frac{[i(p_2 - p_1) + y]^{a-1} y^{3-a}}{(y + ip_2)^5}\, dy, \tag{12}$$

$$j_2 = -\int\limits_0^\infty \frac{(y + p_2)^{a-1} (y + p_1)^{3-a}}{(y + 2)^5}\, dy. \tag{13}$$

При $\omega \to 0$ из формул (6) и (3) получаем

$$\mathrm{Re}\, J_2 \to 1/12\omega^2, \quad Q(\omega) \to -1/12\omega^2. \tag{14}$$

При $\omega \to -{}^1/_2$ $a \to -\infty$ и интегралы (12), (13) преобразуются к виду

$$\mathrm{Re}\, J_2(-{}^1/_2) = -\,\mathrm{Re} \int\limits_0^\infty \frac{e^{2it}\, t\, dt}{(1 + it)^5} - \int\limits_0^1 \frac{e^{2t}\, t\, dt}{(t + 1)^5} \cong -0{,}190,$$

$$Q(-{}^1/_2) = {}^2/_3 e^{-2} = 0{,}0905. \tag{15}$$

При промежуточных значениях ω интегралы J_1 и J_2 были получены численным интегрированием и приведены в табл. 1.

Поскольку при $\omega \to {}^1/_2$ интегралы J_1 и J_2 стремятся к постоянным значениям, то вблизи порога ионизации (практически для частоты ω, большей второй собственной частоты) поляризуемость близка к выражению

$$\alpha(\omega) = -4{,}96\, \mathrm{ctg}\, (\pi / \sqrt{1 - 2\omega}) + 1{,}80, \tag{16}$$

которое последним слагаемым отличается от аналогичного выражения, полученного в работе [3] с использованием асимптотического представления координатной функции Грина вблизи порога ионизации.

Таблица 1

$-\omega$	$-Q(\omega)$	$\mathrm{Re}J_2$	$f(2,\omega)$	$-\omega$	$-Q(\omega)$	$\mathrm{Re}J_2$	$f(2,\omega)$	ω	$f(2,\omega)$	$\alpha(\omega)$
0,500	0,0904	—0,190		0,297	0,177	0,090	5,49	0,00	1,50	4,5
0,443	0,105	—0,155	51,23	0,269	0,201	0,206	4,24	0,05	1,35	4,5
0,435	0,108	—0,151	3,68	0,262	0,208	0,239	4,04	0,10	1,23	4,7
0,430	0,110	—0,147	0,915	0,255	0,214	0,276	3,86	0,15	1,12	5,1
0,424	0,112	—0,142	—1,025	0,241	0,230	0,357	3,52	0,20	1,03	6,0
0,418	0,114	—0,136	—2,80	0,234	0,240	0,423	3,36	0,25	0,965	7,9
0,411	0,117	—0,129	—4,85	0,226	0,250	0,490	3,21	0,30	0,912	10,
0,403	0,120	—0,121	—7,82	0,208	0,276	0,653	2,94	0,35	0,861	26,
0,394	0,123	—0,110	—13,6	0,190	0,309	0,916	2,70	0,40	0,810	—14,
0,383	0,128	—0,097	—34,9	0,169	0,355	1,31	2,47	0,45	0,768	+9,1
0,371	0,133	—0,072	+83,7	0,147	0,421	1,98	2,27	0,50	0,730	—
0,357	0,140	—0,056	19,4	0,135	0,466	2,51	2,17			
0,340	0,149	—0,025	10,9	0,122	0,524	3,26	2,08			
0,321	0,161	+0,020	7,41	0,063	1,11	15,6	1,752			

Получим теперь ряд для $\alpha(\omega)$ по положительным степеням ω и определим коэффициенты этого разложения. Функция $f(\omega)$, фигурирующая в формулах (2), удовлетворяет дифференциальному уравнению [1, 2]

$$[p(p-2)-2\omega]f_p'(p,\ \omega)+(4p-6)f=96/p^5. \tag{17}$$

Разлагая $f(p,\ \omega)$ по степеням ω и подставляя это разложение в (17), для коэффициентов разложения получим:

$$p(p-2)f_0'+(4p-6)f_0=\frac{96}{p^5},\quad f(p,\omega)=\sum_{n=0}^{\infty}f_n(p)\,\omega^n, \tag{18}$$

$$\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots$$

$$p(p-2)f_n'+(4p-6)f_n=2f_{n-1}',\quad f_0=12/p^4+24/p^5. \tag{18'}$$

Из (18′) получаем:

$$f_n(p)=\frac{2}{p^3(p-2)}\int\limits_2^p f_{n-1}'(z)\,z^2dz,\to f_n(p)\Big|_{p=2}=f_{n-1}'(2)=\frac{d^n}{dp^n}f_0(p)\Big|_{p=2}. \tag{19}$$

Подставляя (19) в (18), после n-кратного дифференцирования $f_0(p)$ получаем разложение (в виде асимптотического ряда) для $\alpha(\omega)$ и для важных в спектроскопия сумм $S(k)$:

$$\alpha(\omega)=\frac{1}{48}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2n+9)\,(2n+4)!}{2^{2n}}\,\omega^{2n}\simeq\frac{9}{2}+\frac{165}{4}\,\omega^2+\frac{1365}{2}\,\omega^4+\ldots; \tag{20}$$

$$S(k)\equiv 2\sum_n\frac{|z_{0n}|^2}{\nu_{0n}^k}=\frac{(k+8)\,(k+3)!}{3\cdot 2^{k+3}},\quad k=0,1,2,\ldots \tag{21}$$

Последнее равенство (21) следует из сравнения (20) с разложением (1) по степени ω^2.

Поступило
5 I 1970

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] М. Н. Адамов, ДАН, 133, 315 (1960). [2] Ch. Schwartz, J. J. Tiemann, Ann. of Phys., 6, 178 (1959). [3] С. В. Христенко, С. И. Ветчинкин, Оптика и спектроскопия, 26, 310 (1969).